ヤーン・テラー効果における Berryの位相(Berryの位相,基研短期研究会「トポロジーの物理への応用」報告,研究会報告)

青木, 秀夫

[9] 倉辻，飯田：本研究会の講演

[10] Y. Aharanov and J. Anandan : Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 1593.

ヤーン・テラー効果におけるBerryの位相

東大◦理　青　木　秀　夫

1. 序

ベリーの位相は量子力学の基本的帰結であるが，これが物理の様々な分野に現われることに最近興味がもたれている。この中には

a) 量子ホール効果[1-3]

b) 分子やクラスターの変形と電子構造[4]

c) ゲージ場の理論[5]

等が含まれる。最近Ham[6]が，化学物理において馴染み深いヤーン・テラー効果においても，ボルン・オッペンハイマー近似での波動関数の性質をベリーの位相という観点で理解できることを示しているので，この仕事を紹介した。

これは，ヤーン・テラー（複数軌道）問題における電子の波動関数ψが，空間を360°回転させても元に戻らず

$$\psi(2\pi) = -\psi(0)$$

のように符号が変わるという，Longuet-Higgins[7]の時代から知られていた性質を，原子核の座標を断熱パラメータとしたときの電子波動関数のベリーの位相と見なせる，ということである。フォノンの波動関数ϕも符号が変わるので，全波動関数$\psi\phi$は勿論一価関数となる。

2. ヤーン・テラー効果

結晶中の錯体（例えばMgO中のCu）の電子と原子核に対する全ハミルトニアン

$$\mathcal{H}_{\rm total} = \mathcal{H}_{\rm el} + \mathcal{H}_{\rm n} + \mathcal{H}_{\rm el\text{-}n}$$

の中の電子と核との相互作用は，核の平衡の回りの基準振動座標$\underline{Q}$を用いて

$$\mathcal{H}_{\rm el-n} = V_{\rm cf} + \sum_{\Gamma} V_{\Gamma}^{(1)} Q_{\Gamma} + \cdots$$

のように展開される。ここで$V_{\rm cf}$は結晶場ポテンシャル，Γは錯体の対称群の既約表現。$\mathcal{H}_{\rm el}+V_{\rm cf}$で決まる電子状態が縮退している（ヤーン・テラー・イオン）の場合，この展開は，上式右辺のようにQの一

次の項が主要項となる。例としては，図１のように，八面体のMX_6型鎖体があり，この場合関与するのは２種の電子波動関数

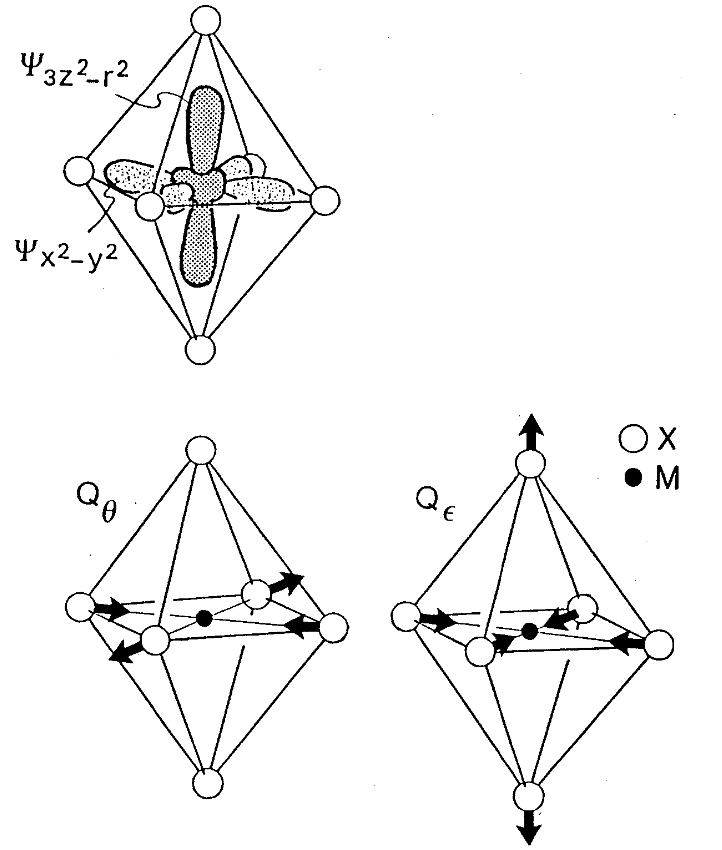

図１

$$\psi_\theta \propto (3z^2 - r^2)$$
$$\psi_\varepsilon \propto (x^2 - y^2)$$

と２種のフォノン基準モード Q_θ，Q_ε である。ψ_θ，ψ_ε を基底とすると

$$\mathscr{H}_{\mathrm{el-n}} \propto \begin{pmatrix} -Q_\theta & Q_\varepsilon \\ Q_\varepsilon & Q_\theta \end{pmatrix}$$

と表わされ，これを対角化する電子状態はQを

$$Q_\theta = \rho \sin\theta$$
$$Q_\varepsilon = \rho \cos\theta$$

と表わすと，

$$\psi^+ = \psi_\theta \cos\frac{\theta}{2} + \psi_\varepsilon \sin\frac{\theta}{2}$$

$$\psi^- = -\psi_\theta \sin\frac{\theta}{2} + \psi_\varepsilon \cos\frac{\theta}{2}$$

となる。これら$\psi^{\pm}$は，$\theta \to \theta + 2\pi$とすると符号を変えるが，これは，$Q_\theta - Q_\varepsilon$空間でQを円上を断熱的に一周させたときに電子波動関数が得るベリーの位相と見なせる。

3. 擬スピンによる記述

上と同等であるが，もう一つの見方が擬スピン[8,9]

$$\tau = (\tau_x, \tau_y, \tau_z)$$

を用いても与えられる。ここで$\tau_z = +\frac{1}{2}\ (-\frac{1}{2})$が$\psi_\varepsilon$占有（$\psi_\theta$占有）に対応するが，詳しくはパウリ行列と同形に

$$\tau_+ = C_\varepsilon^\dagger C_\theta, \quad \tau_- = C_\theta^\dagger C_\varepsilon,$$

$$\tau_z = \frac{1}{2}(C_\varepsilon^\dagger C_\varepsilon - C_\theta^\dagger C_\theta)$$

で定義される。ヤーン・テラー結合が

$$\mathscr{H}_{el-n} \propto Q_\theta \tau_x + Q_\varepsilon \tau_z$$

であることから，τがQ方向での上下向スピン状態で対角化され，この際のスピン軸の回転に対し，(ψ_ε, ψ_θ)がスピノルと同じ変換性をもつことが，ベリーの位相に対応するといえる。この変換性は，構造的には，$\mathscr{H}_{total}$と交換する有効スピンが存在する為で，これが交換したのは，関与するモードが2個のみ($\mathscr{H}_{el-n}$の中にτ_x，τ_y，τ_zの内2個だけが現われる）ことに由来する。これから，上の議論が一般にどの様な場合に成立つかがわかる。これらの協力的ヤーン・テラー効果等への拡張も面白い問題であろう。

References

[1] D. Arovas, J. R. Schrieffer and F. Wilczek, Phys. Rev. Lett. **53** (1984) 722.

[2] Q. Niu, D. J. Thouless and Y. S. Wu, Phys. Rev. **B31** (1985) 3372.

[3] H. Aoki and T. Ando, Phys. Rev. Lett. **57** (1986) 3093.

[4] G. Delacrétaz, E. R. Grant, R. L. Whetten, L. Wöste and J. W. Zwanziger, Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 2598.

[5] F. Wilczek and A. Zee, Phys. Rev. Lett. **52** (1984) 2111.

[6] F. S. Ham, Phys. Rev. Lett. **58** (1987) 725.

[7] H. C. Longuet-Higgins, U. Öpik, M. H. L. Pryce and R. A. Sack, Proc. Roy. Soc. London, Ser. **A244** (1958) 1.

[8] K. I. Kugel' and D. I. Khomskii, Sov. Phys. -JETP **37** (1973) 725.

[9] H. Aoki and H. Kamimura, Solid State Commun. **63** (1987) 665.